

Динамика спин-орбитального экситона в Sr_2IrO_4 с учетом хундовского взаимодействия

Дикушина Е.А.¹

Научный руководитель: Аввакумов И.Л.², ассистент кафедры теоретической физики
Институт естественных наук и математики, Уральский федеральный университет
¹eadikushina@gmail.com; ²ilya.avvakumov@urfu.ru

В данной работе исследуется Sr_2IrO_4 – недавно синтезированное в лаборатории соединение. Оно относится к оксидам переходных $5d$ металлов, но в отличие от других соединений этой группы является моттовским диэлектриком. Вещество обладает слоистой структурой перовскита и может быть представлено как квазидвумерный гайзенберговский антиферромагнетик с псевдоспином $1/2$, где за псевдоспин принимается полный момент иона Ir. Соединение привлекло внимание исследователей как возможный высокотемпературный сверхпроводник из-за сходств с купратами [1, 2].

В экспериментальных спектрах Sr_2IrO_4 наблюдается беззарядовая квазичастица – спин-орбитальный экситон. Распространение спин-орбитального экситона в системе без учета правила Хунда затухает из-за нарушения локального магнитного порядка [2, 3]. Тем не менее, в системе с переносом заряда вклад хундовского взаимодействия в электронной структуре иона сравним со спин-орбитальным и не может быть опущен. Благодаря хундовскому взаимодействию появляется новый тип переноса, который делает возможным перенос экситона в Sr_2IrO_4 без нарушения магнитного порядка ионов окружения.

Эффективный гамильтониан, выведенный из гамильтониана Хаббарда для двухузельной системы, в которой на одном из узлов есть возбуждение, предполагает наряду с обычным переносом перенос экситона с изменением спинового состояния. Такой перенос возможен только при учете хундовского взаимодействия. Он приводит к возможности появления состояний, при которых магнитная система не искажается и перенос возбуждения становится выгодным. Такие состояния соответствуют незатухающему экситону.

Целью работы является рассмотрение совместного действия переносов обоих типов – с изменением спинового состояния ионов и без изменения – и изучение их вкладов в распространение спин-орбитального возбуждения в Sr_2IrO_4 .

Для исследования используется компьютерное моделирование, в основе которого лежит метод высокотемпературного разложения Stochastic Series Expansion [5] с изменениями, необходимыми для учета хундовского взаимодействия.

Результаты моделирования для одномерных и двумерных систем подтверждают, что перенос возбуждения с изменением спиновых состояний в Sr_2IrO_4 возможен и вклад такого переноса может оказывать существенное влияние на динамику экситонного состояния.

Литература

1. Kim B.J., Jin H., Moon S.J. et al. *Phys.Rev.Lett.* **101**, 7 (2008).
2. Kim J., Daghofer M., Said A.H. et al. *Nature Communications* **3**, 1 (2014).
3. Kim J., Casa D., Upton M.H., Gog T. et al. *Phys. Rev. Lett.* **108**, 17 (2012).
4. Sandvik A.W., Kurkijärvi J. *Phys.Rev.B* **43** (1991).